



TITLE:

Diatomic Toda格子の熱伝導機構 (研究会「複雑系」,研究会報告)

AUTHOR(S):

蕪木, 英雄; 町田, 昌彦; 伊藤, 伸泰

CITATION:

蕪木, 英雄 ...[et al]. Diatomic Toda格子の熱伝導機構(研究会「複雑系」,研究会報告). 物性研究 1992, 59(3): 283-292

ISSUE DATE:

1992-12-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95013>

RIGHT:

Diatomic Toda 格子の熱伝導機構

燕木英雄、町田昌彦、伊藤伸泰

日本原子力研究所

情報システムセンター

1 序論

非線形相互作用を持つ一次元格子を用い、エネルギー輸送現象の微視的機構を解明するため数値シミュレーションを行なった。本論文では、特に定常熱伝導におけるフーリエの法則が成立する機構を調べるため、diatomic Toda 格子を用いた研究を報告する。

格子振動によるエネルギーの輸送には、局所熱平衡が満たされているフーリエ型のもの、音速で波（調和型、ソリトン、衝撃波など）として伝わるものなどがある。前者の場合、熱は拡散的に伝播し熱伝導方程式で記述される。一方、後者の場合、熱はパルス的に伝播し波動方程式により記述される。これらさまざまな輸送様式を第1原理から統一的にモデル化することには未だに成功していない。また、格子熱伝導におけるフーリエの法則も微視的動力学に基づいた十分な説明はなされていない。

本研究では、格子によるエネルギー輸送の第1原理的モデル化を目指し、定常熱伝導における温度分布の直線性が確認されている diatomic Toda 格子 [3],[4] を用いて熱伝導機構の数値的な解明を行なった。

このような不可逆過程に対する微視的モデルによる数値実験は、非平衡緩和過程の FPU (Fermi-Pasta-Ulam) の問題に始まる。FPU の数値実験では、調和格子に 3 次、4 次の多項式型非線形項を加えたもの (α, β モデル) を原子間ポテンシャルとして採用した。格子熱伝導の数値実験もこのタイプの格子を用いて数多く行なわれたが、定常熱伝導を確認するには至らなかった [1],[2]。Mokross と Büttner [3] は、1983 年に diatomic Toda 格子を用いると定常熱伝導において温度分布が直線性を示すことをはじめて確認した。しかしながら、定常熱伝導におけるフーリエの法則を確認するためには、温度分布の直線性ととも熱伝導率が格子数に依存していないことを確認してそれが内包 (intensive) 量であることを示す必要がある [2]。Jackson と Mistriotis [4] は、最大 400 個の diatomic Toda 格子を用いて熱伝導率の格子数依存性及び不純物原子の質量依存性を調べた。しかしながら、温度分布の直線性、熱伝導率の温度依存性、測定温度範囲、熱浴との相互作用等についての考察が十分でなく、熱伝導の微視的機構は明らかになっていない。一方、Ding-a-ling モデル、Lenard-Jones 鎖、セルラ・オートマトンモデル [5],[6],[7] による 1 次元格子熱伝導数値実験があるが、これらでは温度分布の直線性は得られていない。

本論文では、まず 2 個から 2000 個の粒子で構成される diatomic Toda 格子により、その運動が十分強くカオス的であるエネルギーの閾値及びその閾値の格子サイズ依存性を調べた。これは運動量をわずかずらした位相空間中の 2 点の距離の時間発展を測定することにより調べた。次に熱パルスを 40 個から 100 個の粒子数から構成される格子の一端に加え、このパルスが格子を通過する過程で分裂、衝突を繰り返し格子全体の粒子の運動が熱平衡状態に近づく過程を調べ、運

動量の空間及び時間相関を評価した。また、50 個から 3000 個の粒子から構成される diatomic Toda 格子を熱浴に接触させ、定常状態を実現しフーリエの法則が成立する条件についても議論した。

2 ハミルトン系におけるカオスのエネルギー閾値

Diatomic Toda 格子において、粒子の運動がある一定の強いカオス的な振舞いを示す系のエネルギー閾値を調べるため、ヒートパルスを用いて数値実験を行なった [8]。使用した Diatomic Toda 格子の無次元化したハミルトニアンは次の様に表される。

$$H = \sum_{i=1}^{n+1} \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{\alpha^2} \sum_{i=1}^n \{\exp(-\alpha r_i) + \alpha r_i\} \quad (1)$$

ここで $r_i = x_{i+1} - x_i$ であり、 i が偶数のとき $m_i = 1.0$ 、奇数のとき $m_i = 0.5$ である。 α は、非線形パラメータである。数値計算では、端の原子は固定とし、時間積分は 4 次の Runge-Kutta 法を用いた。時間ステップは十分小さくとり ($\Delta t = 10^{-4}$)、エネルギーの計算精度は 10^{-7} であった。

この系において、系全体の粒子の運動が十分強くカオス的に振舞うエネルギーの閾値を推定するため、以下の様に定義した系の粒子の位相空間中の軌道の分離距離の時間発展を測定した。

$$D(t) = \sqrt{\sum_{i=1}^N (q'_i - q_i)^2 + \sum_{i=1}^N (p'_i - p_i)^2} \quad (2)$$

これは、ある特定粒子の初期条件を僅かにずらした 2 つの系を用意し、それらを同じ条件で時間発展させた時それぞれの系における位相空間中の軌道の分離距離を表している。初期条件としては、運動量を 2 つの系の間で 10^{-6} 違えた。粒子数 5 個の系におけるこの距離の時間発展を Fig.1 に示す。Fig.1 (a),(b),(c) は、粒子 1 個当たりのエネルギー値 ϵ が 0.25, 0.30, 0.35 の場合の結果をそれぞれ示している。最初、直線的に時間発展していた距離は、エネルギーを増加すると Fig.1(b) の様にカオス的な振舞いはじめる。しかし、この場合、分離距離の変化は初期条件に極めて敏感に依存し、また、カオス的な運動に遷移するエネルギーには幅があることなどから、閾値として決定するのは困難である。さらにエネルギーを増加すると Fig.1(c) の様な指数関数的な増加を示すようになる。われわれの最終的な目標は、系全体の原子が十分強くカオス的な運動をして、系が熱力学的振舞いを示す領域を見つけることにあり、閾値として以下のような条件を設定した。すなわち、Fig.2 のように、距離がはじめてから十分指数関数的に増加し、約 10^7 程度の時間で一定値になるエネルギー値を閾値とした。この閾値より上のエネルギー値では、系の原子は十分強くカオス的に振舞っており、熱伝導の法則が成立するものと予測される。

Fig.3 に上記のように決定した閾値と系の粒子数との関係を示す。閾値は粒子数 N が増加するにつれ、だいたい $1/\sqrt{N}$ に従って減少していくのが分かる。この結果により、粒子数を増加するにつれ閾値が 0 に近づくことが予測できる。Fig.4 には、この閾値の非線形パラメータ α 依存性を $N = 10$ の場合について示している。非線形パラメータを減少させると閾値が急激に増加する様子が分かる。FPU の問題で使用している格子 (α , β モデル) は、ここで対象にしている diatomic Toda 格子の不純物粒子の質量を他の粒子の質量に近づけかつ非線形パラメータを小さくした極限と考えられる。上記の 2 つの操作によりエネルギーの閾値を増加させる傾向があるこ

とが、 α 、 β モデルで定常熱伝導のフーリエの法則が実現しにくい理由であると考えられる。

3 定常熱伝導の数値実験

1次元 diatomic Toda 格子上で定常熱伝導におけるフーリエの法則を実現するため、系を熱浴に接触させて数値実験を行なった [9]。

はじめに、この系の熱的特性を調べるため、熱パルスを格子の一端に印加し、このパルスが不純物粒子の所で分裂しどのように熱平衡に緩和していくかを調べた。ここでは、40個の粒子から構成される系が熱平衡に達したと考えられる時点で、各粒子の運動量の時間、空間相関を計算した。その結果、時間相関は、10 - 50 程度、空間相関は、1 - 5 程度で十分小さいことが分かった。また、系における各粒子の運動エネルギーは、ボルツマン分布に従っており、エネルギーの等分配が成立していることが分かった。特に、空間相関の結果は、この格子で十分に局所熱平衡が成立していることを示している。

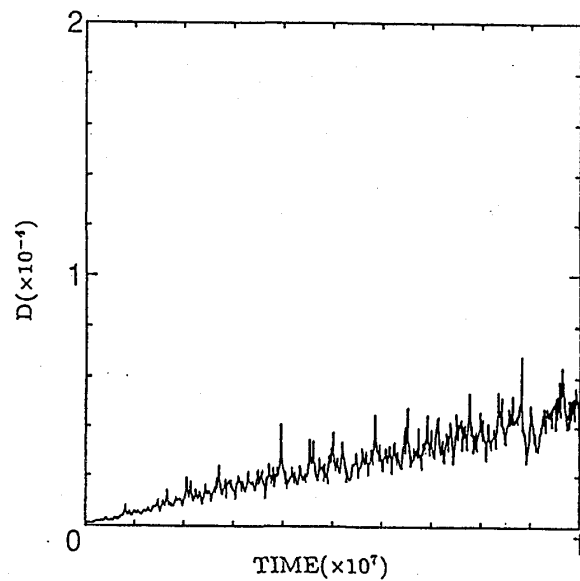
熱浴のモデルの概要を Fig.5 に示す。 $N+2$ 個粒子から構成される体系を用い、0番目と $N+1$ 番目の粒子の位置は固定とする。1番目と N 番目の粒子に対して、それぞれ高温、低温の熱浴に対応するマックスウエル分布より抽出した速度を設定する。この速度は各時間ステップ毎に更新する。ここで高温と低温の熱浴の温度をそれぞれ 10 と 1 に設定した。この設定温度は、Jackson and Mistriotis による高温及び低温熱浴の温度 100 と 10 に比較して十分低温でありかつ前章で計算した閾値より十分大きい値である。ここでは、体系内の各粒子の温度をその粒子の運動エネルギーの平均値を 2 倍したものと定義した。粒子数 $N = 50, 100, 200, 500, 1000, 2000, 3000$ の系について定常熱伝導の数値実験をした結果を Fig.6($N = 50$), Fig.7($N = 2000$) に示す。この結果より、十分低温でも閾値より上の温度領域であれば、系の大きさが十分小さくても直線性が十分成立していることが分かる。系が十分定常に達した後、エネルギーフラックスを計算し熱伝導率を評価した。ここで、エネルギーフラックスは、Jackson [2] に従い全格子エネルギーフラックスを用いた。熱伝導率の格子数依存性を Fig.8 に示す。格子数 N が 500 より小さい領域では、熱伝導率は \sqrt{N} に比例して増加するが、それより N が大きい領域では一定値に近づく様子が見られる。これと関係して、温度分布の図 Fig.6,7 より、熱浴と格子の接触点に生じる温度差が系の粒子数を増加するにつれ減少することが分かる。これは、十分カオス的なエネルギー領域でも定常熱伝導のフーリエの法則の様な巨視的な法則が成立するためには格子数を十分大きくする必要があることを示している。

4 結論

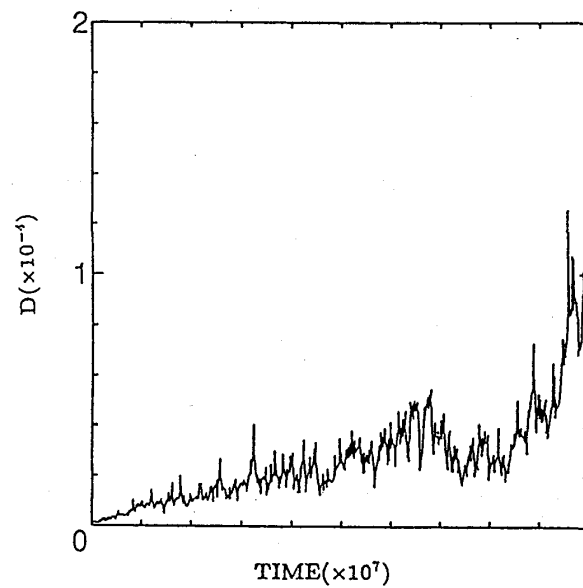
一次元格子系において熱力学的性質が成立する領域の条件を調べるため、Diatomic Toda 格子で系の粒子が十分強くカオス的に運動するエネルギー閾値を数値的に決定した。この閾値は、格子数 N に対し、だいたい $1/\sqrt{N}$ で減少することが明らかになった。また、非線形パラメータ α が減少するにつれ閾値が増加することが分かった。一方、これらの結果に基づき熱伝導におけるフーリエの法則が成立する機構を調べるため、粒子数 $N = 50 - 3000$ からなる系を熱浴に接続して定常熱伝導の数値実験を行なった。その結果、十分低温で少数粒子系においても温度分布は直線性を示すことが分かった。また、粒子数 3000 までの熱伝導率の格子数依存性を調べた。その結果、完全にフーリエの法則が成立するためには、測定温度範囲が十分強いカオス的な領域にあっても、粒子数を増加する必要があることが分かった。

参考文献

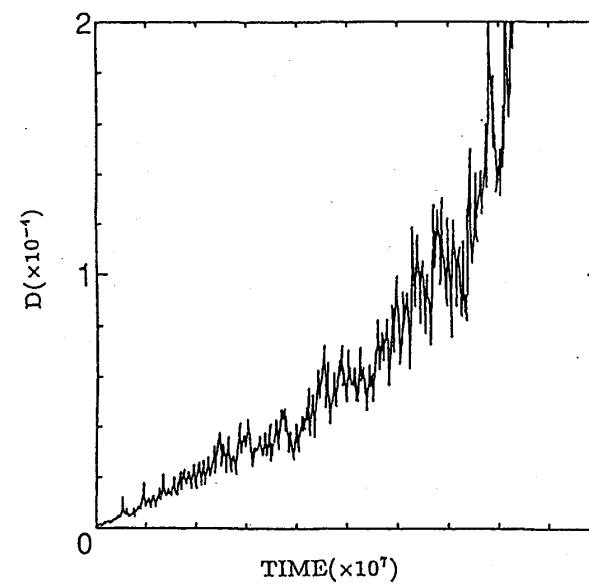
- [1] W.M.Visscher, Methods of Computational Physics, 15, 371 (1976).
- [2] E.A.Jackson, Rocky Mountain Journ.Math., 8(1/2), 127 (1978).
- [3] F.Mokross and H.Büttner, J.Phys.C: Solid State Phys. 16(1983)4539.
- [4] E.A.Jackson and A.D.Mistriotis, J.Phys.: Condens. Matter 1(1989)1223.
- [5] G.Casati et al., Phys.Rev.Lett., 52(21)1861 (1984).
- [6] M.Mareschal and A.Amellal, Phys.Rev.A, 37(6)2189 (1988).
- [7] S.Takesue, Phys.Rev.Lett., 64(3)252 (1990).
- [8] M.Machida, H.Kaburaki, and N.Ito, in preparation.
- [9] H.Kaburaki, M.Machida, and N.Ito, in preparation.



(a) $\epsilon = 0.25$



(b) $\epsilon = 0.30$



(c) $\epsilon = 0.35$

Fig.1 位相空間中の粒子軌道の分離距離 ($N = 5$ の場合)

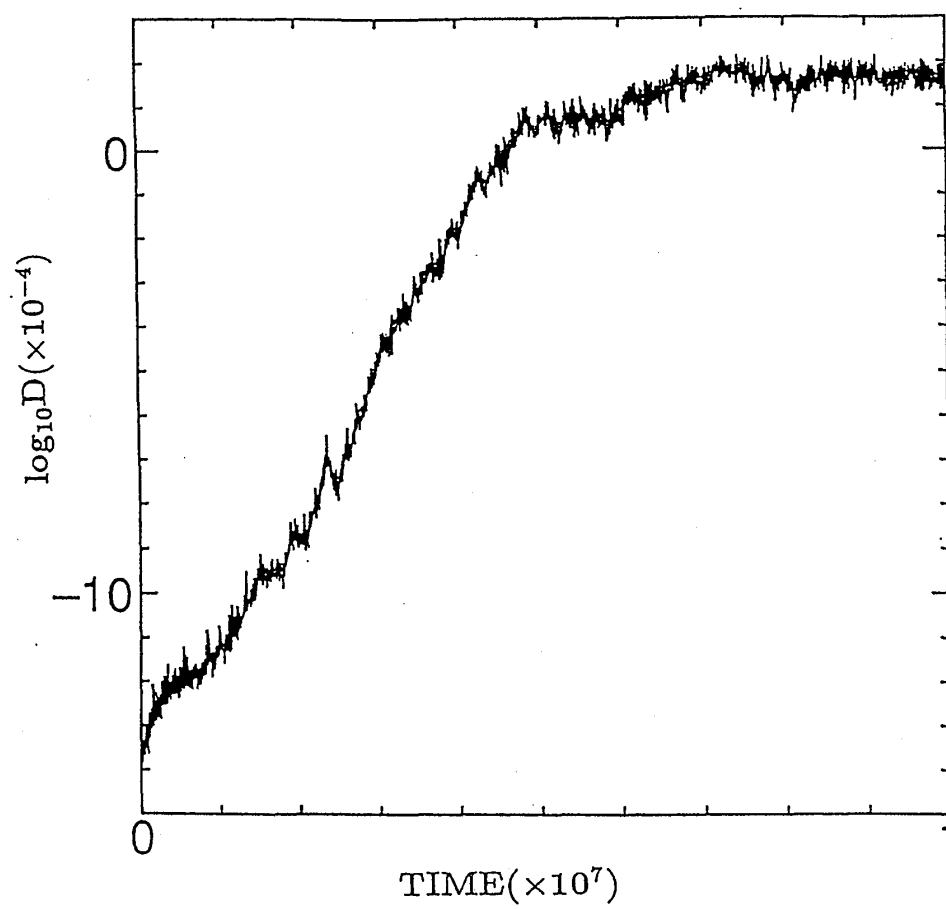


Fig.2 カオス領域における分離距離の振舞い ($N = 5, \epsilon = 1.0$)

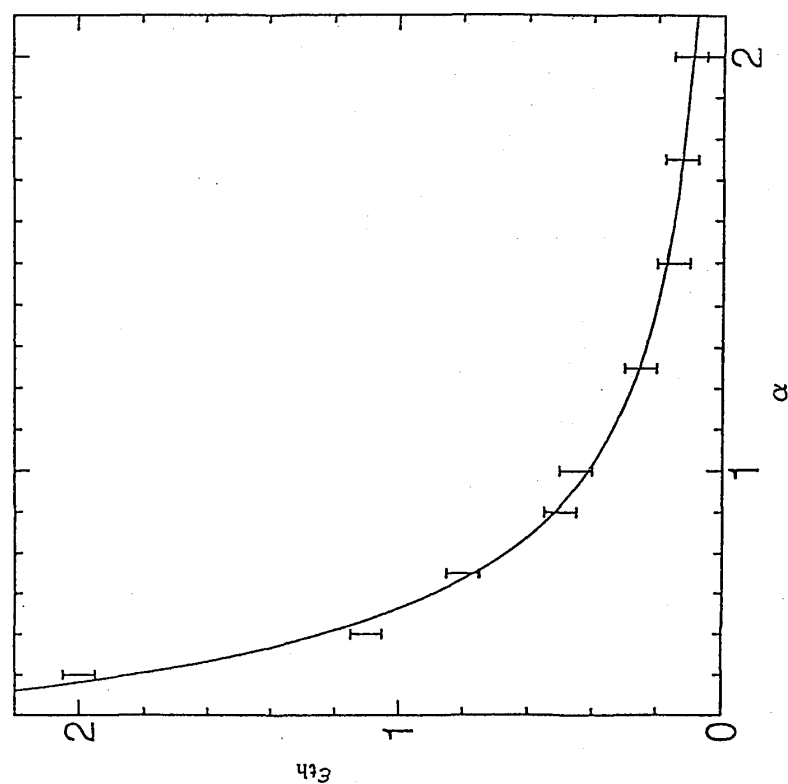


Fig.4 エネルギーギャー関値の非線形パラメータ依存性

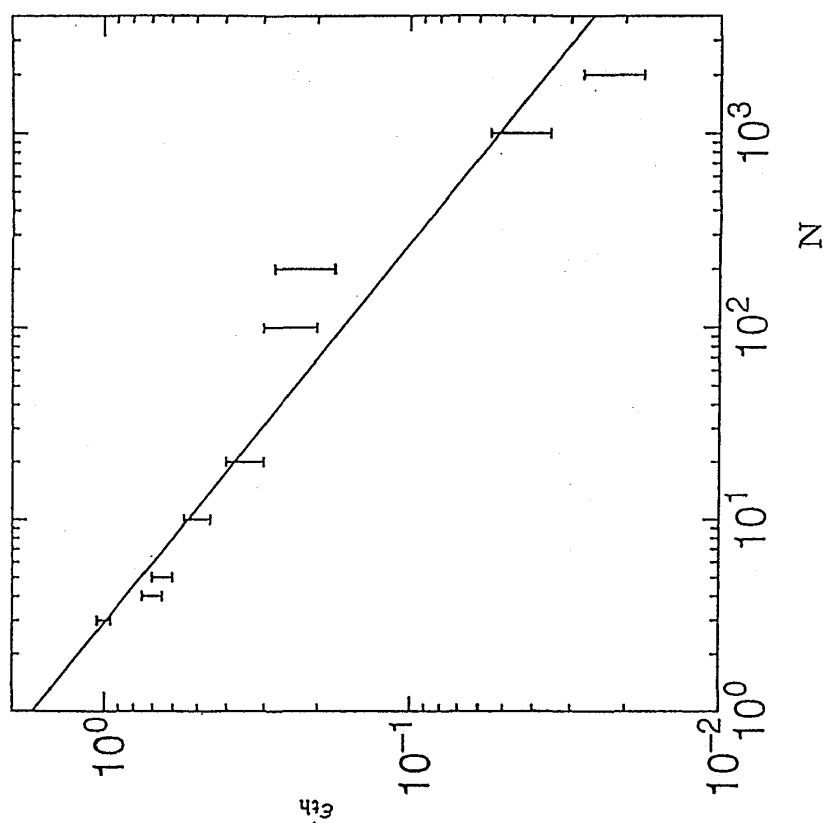


Fig.3 エネルギーギャー関値の格子数依存性

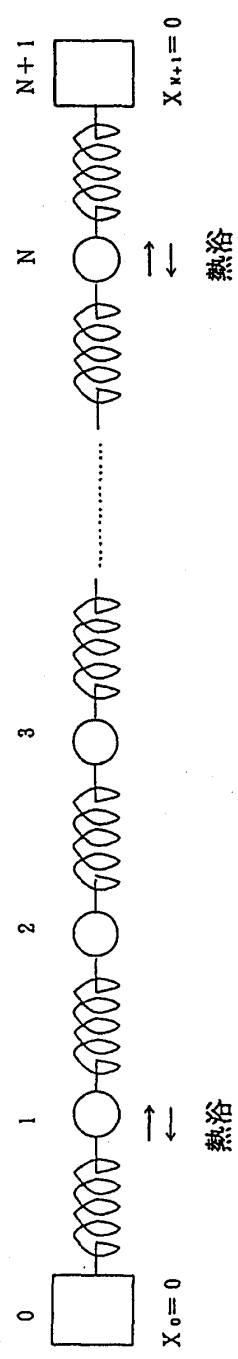


Fig.5 定常熱伝導の格子モデル

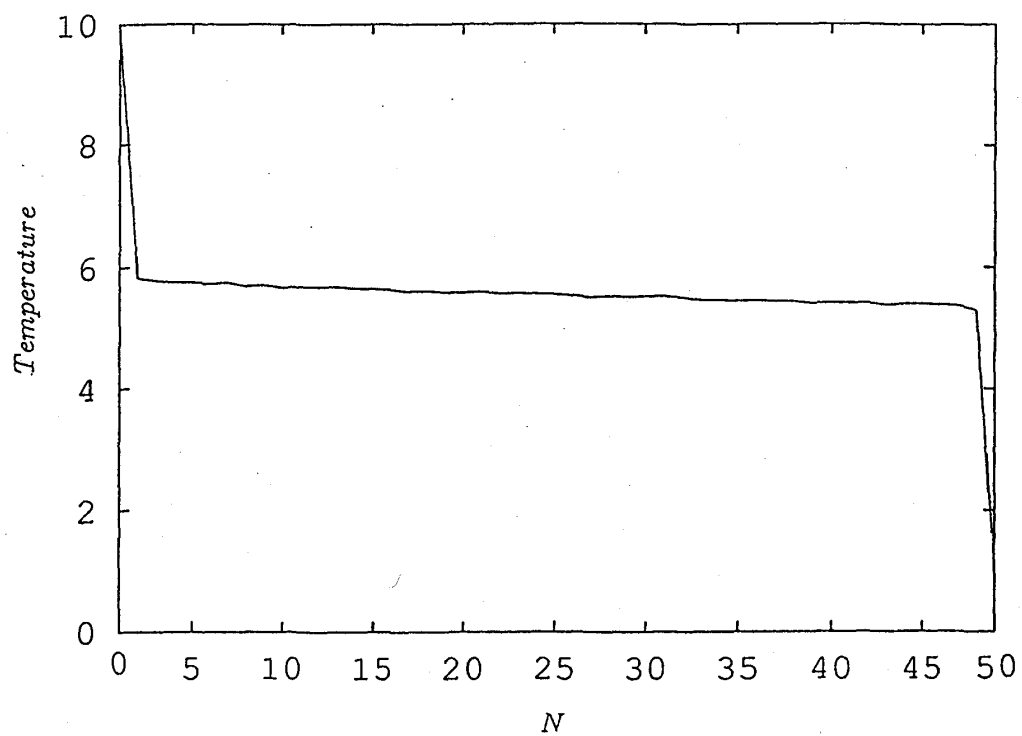


Fig.6 格子数 50 の場合の温度分布

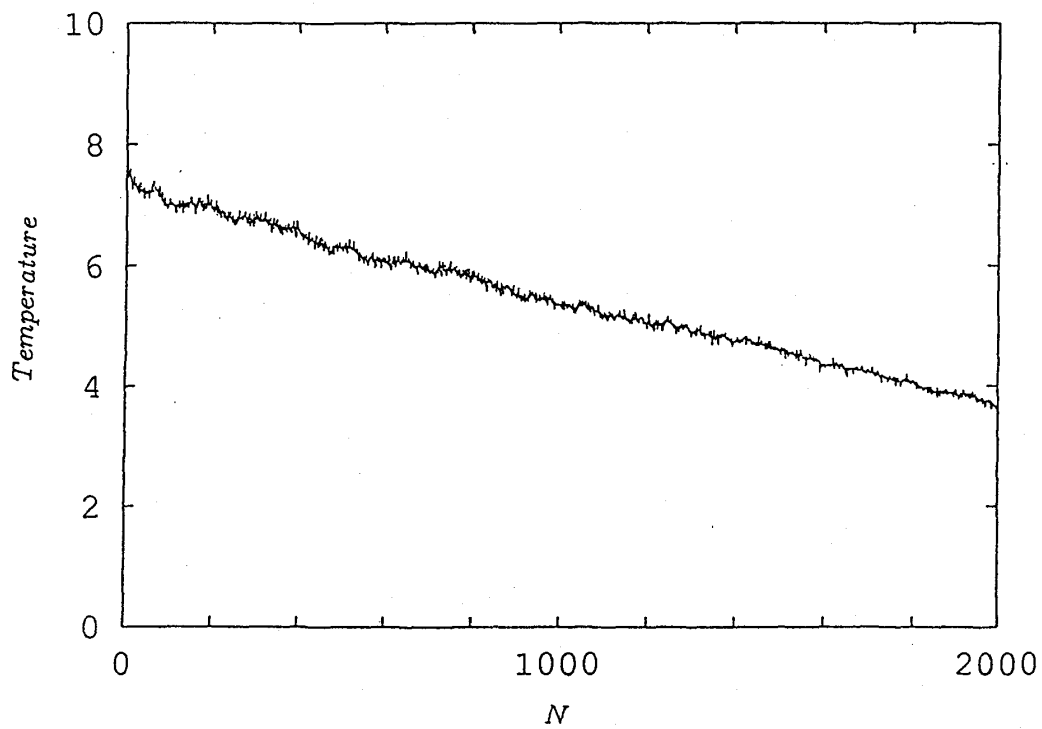


Fig.7 格子数 2000 の場合の温度分布

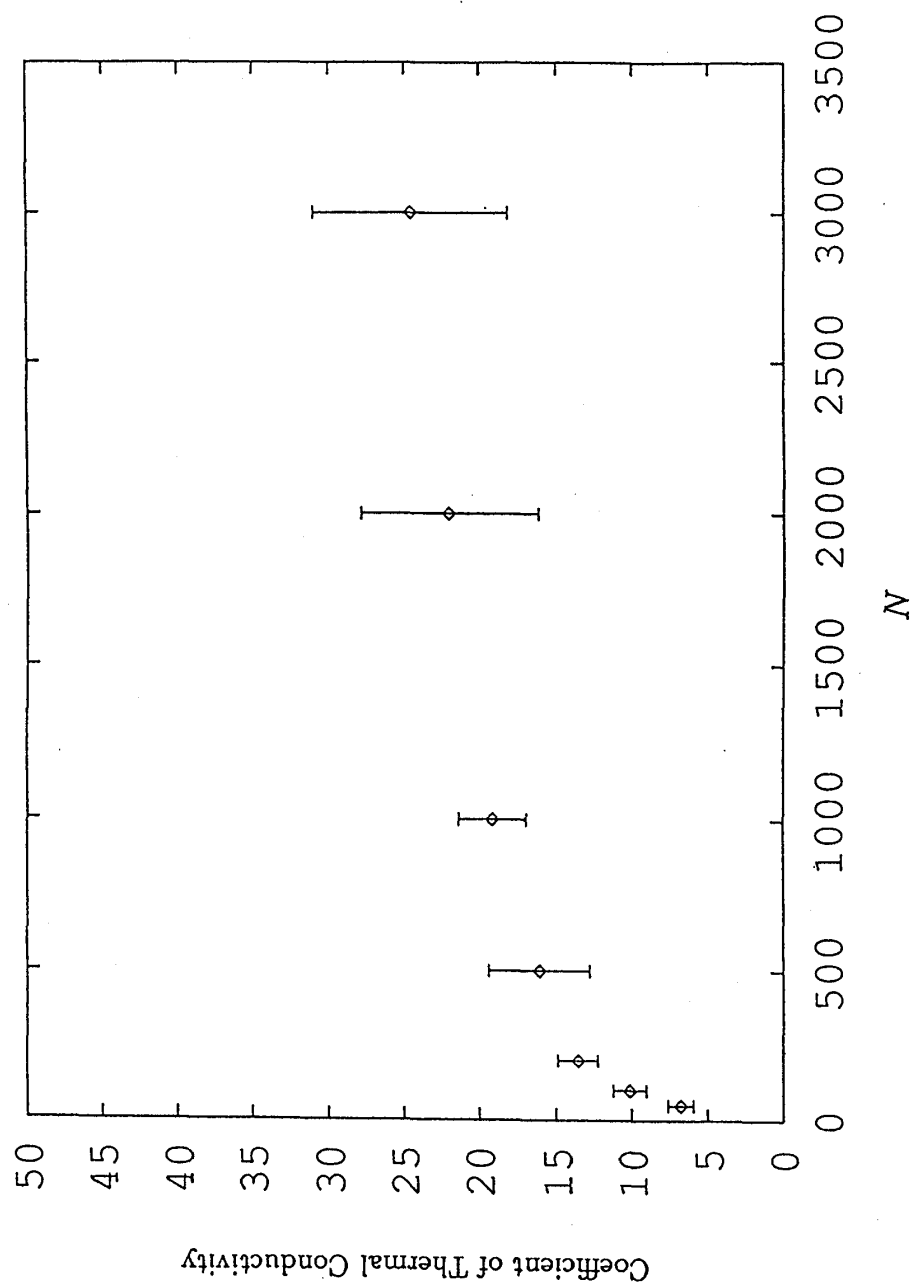


Fig.8 熱伝導率の格子数依存性